§9.4 Sturm-Livouville 本征值问题

从第八章和本章前三节看到，由数学物理偏微分方程的分离变效法引出的常微分方程，往往附有边界条件，这些边界条件有的是明白提出来的，有的却是没有明白提出来的所谓自然的条件．满足这些边界条件的有意义的解往往不存在，除非方程的参数取某些特定值．这些特定值叫作本征值，相应的非零有限解叫作本征函数．求本征值和本征函数的问题叫作本征值问题．

常见的本征值问题都归结为 Sturm-Livouville 本征值问题，本节就讨论 Sturm-Livouville 本征值问题．

9.4.1 Sturm-Livouville 本征值问题

定义二阶常微分方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k(x)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right]-q(x)y+\lambda\rho(x)y=0,\qquad a\leq x\leq b. \tag{9.4-1}$$

为 Sturm-Livouville 型方程.

一般的二阶常微分方程

$$y'' + a(x)y' + b(x)y + \lambda c(x)y = 0$$

乘以适当的函数 $e^{\int a(x)dx}$，就化 Sturm-Livouville 型方程

$$\frac{d}{dx}\left[e^{\int a(x)dx}\frac{dy}{dx}\right] + \left[b(x)e^{\int a(x)dx}\right]y' + \lambda\left[c(x)e^{\int a(x)dx}\right]y = 0.$$

Sturm-Livouville 型方程(9.4-1)附以齐次的第一类、第二类或第三类边界条件，或自然的边界条件，就构成 Sturm-Livouville 本征值问题. 例如，适当选择 $a, b, k(x), q(x), \rho(x)$，就可以由 Sturm-Livouville 本征值问题得到物理和工程技术上常见的几个本征值问题.

❶$a = 0, b = l; k(x) =$ 常数$, q(x) = 0, \rho(x) =$ 常数，本征值问题为

$$\begin{cases} y'' + \lambda y = 0, \\ y(0) = 0, \quad y(l) = 0. \end{cases} \tag{9.4-2}$$

本征值和本征函数是：$\lambda = \frac{n^2\pi^2}{l^2}, y = C\sin\frac{n\pi x}{l}$.

❷ $a = -1, b = +1; k(x) = 1 - x^2, q(x) = 0, \rho(x) = 1$．或
$a = 0, b = \pi; k(\theta) = \sin\theta, q(\theta) = 0, \rho(\theta) = \sin\theta$．就得到 Legendre 方程的本征值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right] + \lambda y = 0, \\ y(-1) = \text{有限}, \ y(+1) = \text{有限}. \end{cases} \quad \text{或} \quad \begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right) + \lambda\sin\theta\Theta = 0, \\ \Theta(0) = \text{有限}, \quad \Theta(\pi) = \text{有限}. \end{cases} \tag{9.4-3}$$

本征值和本征函数是 $l(l+1)$ 和 Legendre 函数.

❸$a = -1, b = +1; k(x) = 1 - x^2, q(x) = \frac{m^2}{1-x^2}, \rho(x) = 1$ 或
$a = 0, b = \pi; k(\theta)\sin\theta, q(\theta) = \frac{m^2}{\sin\theta}, \rho(\theta) = \sin\theta$，就得到连带 Legendre

方程的本征值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right]-\dfrac{m^2}{1-x^2}y+\lambda y=0, \\ y(-1)=\text{有限},\ y(+1)=\text{有限}. \end{cases}$$

或 (9.4-4)

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)-\dfrac{m^2}{\sin\theta}\Theta+\lambda\sin\theta\Theta=0, \\ \Theta(0)=\text{有限},\quad \Theta(\pi)=\text{有限}. \end{cases}$$

❹$a=0, b=\xi_0; k(\xi)=\xi, q(\xi)=\frac{m^2}{\xi}, \rho(\xi)=\xi$，就得到 Bessel 方程的本征值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\xi\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\xi}\right]-\dfrac{m^2}{\xi}y+\lambda\xi y=0, \\ y(0)=\text{有限},\ y(\xi_0)=0. \end{cases} \tag{9.4-5}$$

这里的 ξ 其实是柱坐标系或平面极坐标系的 ρ，为了避免与

Sturm-Livouville 型方程中的 ρ 相混淆改用记号 ξ．上面写出的这个方程就是(9.1-19)和(9.1-47)，而 $\lambda=\mu$，还要作代换 $x=\sqrt{\lambda}\xi$ 才成为标准形式的 Bessel 方程．

❺ $a=0, b=+\infty; k(x)=\mathrm{e}^{-x^2}, q(x)=0, \rho(x)=\mathrm{e}^{-x^2}$，就得到 Hermite 方程

$$y''-2xy'+\lambda y=0$$

的本征值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\mathrm{e}^{-x^2}\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right]+\lambda\mathrm{e}^{-x^2}y=0, \\ x\to\pm\infty\text{时，}y\text{的增长不快于}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}x^2}. \end{cases} \tag{9.4-6}$$

这个本征值问题来自量子力学中的谐振子问题，其解见附录十．

❺ $a=0, b=+\infty; k(x)=x\mathrm{e}^{-x}, q(x)=0, \rho(x)=\mathrm{e}^{-x}$，就得到 Laguerre 方

程

$$xy'' + (1-x)y' + \lambda y = 0$$

的本征值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[x\mathrm{e}^{-x}\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right] + \lambda \mathrm{e}^{-x}y = 0, \\ y(0) = \text{有限},\ x\to\infty\text{时，}y\text{的增长不快于}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}}. \end{cases} \tag{9.4-7}$$

这个本征值问题来自量子力学中的氢原子子问题，其解见附录十一.

在以上各例中，$k(x), q(x)$ 和 $\rho(x)$ 在开区间 (a, b) 上都取正值.

从以上各例，还可看出：如端点 a 或 b 是 $k(x)$ 的一级零点，在那个瑞点就存在着自然的边界条件，使得无限解排除而得到有限解. 例如：

❶ Legendre 方程的 $k(x) = 1 - x^2, k(\pm 1) = 1 - (\pm 1)^2 = 0$，在端点 $x = \pm 1$ 确实存在自然边界条件(见 § 9.2).

❷ Bessel 方程的 $k(x) = x, k(0) = 0$，在端点 $x = 0$ 确实存在着自然边界条件(见 § 9.3).

❸ Laguerre 方程的 $k(x) = xe^{-x}, k(0) = 0$，在端点 $x = 0$ 确实有自然边界条件(见 § 9.3 习题3和甜录十一).

自然边界条件的存在是不难证明的．Sturm-Livouville 型方程

$$k(x)y'' + k'(x)y' - q(x)y + \lambda\rho(x)y = 0,$$

即

$$y'' + \frac{k'(x)}{k(x)}y' + \frac{-q(x) + \lambda\rho(x)}{k(x)}y = 0.$$

如瑞点 $x = a$ 是 $k(x)$ 的一级零点，则它也就是 y' 的系数 $k'(x)/k(x)$ 的一阶极点．只要 $x = a$ 是 $[-q(x) + \lambda\rho(x)]$ 不高于一阶的极点(以上各例均满足此条件)，则它就是 y 的系数函数 $[-q(x) + \lambda\rho(x)]/k(x)$ 的不高于两阶的极点，从而是方程的正则奇点．从而由此可以证明其有限解的存在必然要求自然边界条件的存在（P.264）.

9.4.2 Sturm-Livouville 本征值问题的共同性质

当 $k(x), q(x)$ 和 $\rho(x)$ 在开区间 (a, b) 上都取正值时，Sturm-Livouville 本征值问题具有如下的共同性质．我们将只给出性质(2)和性质(3)的证明．

✪ ❶如 $k(x), q(x)$ 和 $\rho(x)$ 连续或者最多以 $x = a$ 和 $x = b$ 为一阶极点，则存在无限多个本征值

$$\lambda_1 \le \lambda_2 \le \lambda_3 \le \lambda_4 \le \cdots , \tag{9.4-8}$$

相应地有无限多个本征函数

$$y_1(x), y_2(x), y_3(x), y_4(x), \cdots . \tag{9.4-9}$$

这些本征函数的排列次序正好使节点个数依次增多(节点个数的性质在量子力学中可用以很方便地判断哪个波函数代表基态)．

✪ ❷所有本征值 $\lambda \ge 0$．

证：本征函数 $y_n(x)$ 和本征值 λ_n 满足

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k(x)\frac{\mathrm{d}y_n}{\mathrm{d}x}\right]+q(x)y_n=\lambda_n\rho(x)y_n.$$

用 y_n 遍乘上式各项，并逐项由 a 到 b 积分，有

$$\begin{aligned}\lambda_n\int_a^b \rho y_n^2\mathrm{d}x &= -\int_a^b y_n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k\frac{\mathrm{d}y_n}{\mathrm{d}x}\right]\mathrm{d}x+\int_a^b qy_n^2\mathrm{d}x\\ &= -\left[ky_n\frac{\mathrm{d}y_n}{\mathrm{d}x}\right]_a^b+\int_a^b k\left(\frac{\mathrm{d}y_n}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x+\int_a^b qy_n^2\mathrm{d}x\\ &= (ky_ny_n')_{x=a}-(ky_ny_n')_{x=b}+\int_a^b ky_n'^2\mathrm{d}x-\int_a^b qy_n^2\mathrm{d}x.\end{aligned}\tag{9.4-10}$$

右边两个积分的被积函数只取 ≥ 0 的值，所以这两个积分 ≥ 0．再看(9.4-10)右边第一项 $(ky_ny_n')_{x=a}$，如果在端点 $x=a$ 的边界条件是第一类齐次条件 $y(a)=0$，或第二类齐次条件 $y_n'(a)=0$，或自然边界条件 $k(a)=0$，这一项 $(ky_ny_n')_{x=a}$ 显然为零．如果在端点 $x=a$ 的边界条

件是第三类齐次条件 $(y_n - hy'_n)_{x=a} = 0$，则

$$(ky_ny'_n)_{x=a} = \left[k(y_n - hy'_n)y'_n + hky'^2_n\right]_{x=a} = h(ky'^2_n)_{x=a} \geq 0.$$

再看(9.4-10)右边第二项一 $(ky_ny'_n)_{x=b}$，如果在端点 $x = b$ 的边界条件是第一类齐次条件 $y_n(b) = 0$，或第二类齐次条件 $y'_n(b) = 0$，或自然边界条件 $k(b) = 0$，这一项 $(ky_ny'_n)_{x=b}$ 显然为零．如果在端点 $x = b$ 的边界条件是第三类齐次条件 $(y_n + hy'_n)_{x=b} = 0$，则

$$-(ky_ny'_n)_{x=b} = -\left[k(y_n - hy'_n)y'_n + hky'^2_n\right]_{x=b} = h(ky'^2_n)_{x=b} \geq 0.$$

既然(9.4-10)右边各项都 ≥ 0，左边必然也 ≥ 0，即

$$\lambda_n \int_a^b \rho y_n^2 \mathrm{d}x \geq 0.$$

上式里的定积分明显是正的，因而

$$\lambda \geq 0. \tag{9.4-11}$$

③相应于不同本征值 λ_m 和 λ_n 的本征函数 $y_m(x)$ 和 $y_n(x)$ 在区间

$[a,b]$ 上带权重 $\rho(x)$ 正交，即

$$\int_a^b y_m(x)y_n(x)\rho(x)\mathrm{d}x = 0, \qquad m \neq n. \tag{9.4-12}$$

证：本征函数 $y_m(x)$ 和 $y_n(x)$ 分别满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[ky_m'\right] - qy_m + \lambda_m\rho y_m = 0,$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[ky_n'\right] - qy_n + \lambda_n\rho y_n = 0.$$

前一式遍乘以 y_n，后一式遍乘以 y_m，然后相减，

$$y_n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[ky_m'\right] - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[ky_n'\right] + (\lambda_m - \lambda_n)\rho y_m y_n = 0.$$

逐项从 a 到 b 积分，得

$$\begin{aligned} 0 &= \int_a^b y_n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[ky_m'\right] - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[ky_n'\right]\mathrm{d}x + (\lambda_m - \lambda_n)\int_a^b \rho y_m y_n \mathrm{d}x \\ &= \int_a^b \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[ky_n y_m' - ky_m y_n'\right]\mathrm{d}x + (\lambda_m - \lambda_n)\int_a^b \rho y_m y_n \mathrm{d}x \end{aligned}$$

$$= \left[ky_n y_m' - ky_m y_n'\right]_{x=b} - \left[ky_n y_m' - ky_m y_n'\right]_{x=a}$$
$$+(\lambda_m - \lambda_n)\int_a^b \rho y_m y_n \mathrm{d}x. \qquad (9.4\text{-}13)$$

现在看右边第一项 $\left[ky_n y_m' - ky_m y_n'\right]_{x=b}$，如果在端点 $x = b$ 的边界条件是第一类齐次条件儿 $y_m(0) = 0$ 和 $y_n(0) = 0$，或第二类齐次条件 $y_m'(0) = 0$ 和 $y_n'(0) = 0$，或自然边界条件 $k(b) = 0$，这一项 $\left[ky_n y_m' - ky_m y_n'\right]_{x=b}$ 显然为零．如果在端点 $x = b$ 边界条件是第三类齐次条件 $(y_m + hy_m')_{x=b} = 0$ 和 $(y_n + hy_n')_{x=b} = 0$，则

$$\left[ky_n y_m' - ky_m y_n'\right]_{x=b} = \frac{1}{h}\left[ky_n(y_m + hy_m') - ky_m(y_n + hy_n')\right]_{x=b} = 0.$$

总之，(9.4-13)右边第一项为零．同理，如果在编点 $x = a$ 的边界条件是第一类、第二类或第三类齐次条件，或者自然边界条件，则(9.4-13)右边第二项为零．这样，(9.4-13)成为

$$(\lambda_m - \lambda_n)\int_a^b \rho y_m y_n \mathrm{d}x.$$

因为 $\lambda_m - \lambda_n \neq 0$，上式即(9.4-12).

如权重 $\rho(x) \equiv 1$，(9.4-12)简单地称为正交.

❹本征函数族 $y_1(x), y_2(x), y_3(x), \cdots$，是完备的．这是说，函数 $f(x)$ 如具有连续一阶导数和分段连续二阶导数，且满足本征函数族所满足的边界条件，就可以展开为绝对且一致收敛的级数

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n y_n(x). \tag{9.4-14}$$

这个性质的证明超出本书范围，我们今后直接使用而证明.

9.4.3 广义 Fourier 级数

(9.4-14)右边的级数叫作广义 Fourier 级数，系数 f_n $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ 叫作 $f(x)$ 的广义 Fourier 系数．函数族 $y_n(x)$ $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ 叫作这级数展开的基.

现在推导广义 Fourier 系数的计算公式.

由于广义 Fourier 级数(9.4-14)是绝对且一致收敛的，可以逐项积分．用 $y_m(x)\rho(x)$ 遍乘(9.4-14)地项，并逐项积分，积分，

$$\int_a^b f(\xi)y_m(\xi)\rho(\xi)d\xi = \sum_{n=1}^{\infty} y_n \int_a^b y_n(\xi)y_m(\xi)\rho(\xi)d\xi.$$

由于正交关系(9.4-12)，上式右边除 $n = m$ 的一项之外全为零，

$$\int_a^b f(\xi)y_m(\xi)\rho(\xi)d\xi = y_m \int_a^b \left[y_m(\xi)\right]^2 \rho(\xi)d\xi.$$

令

$$N_m^2 = \int_a^b \left[y_m(\xi)\right]^2 \rho(\xi)d\xi \tag{9.4-15}$$

积分(9.4-15)的平方根 N_m 叫作 $y_m(x)$ 的模．于是

$$f_m = \frac{1}{N_m^2}\int_a^b f(\xi)y_m(\xi)\rho(\xi)d\xi. \tag{9.4-16}$$

这就是广义 Fourier 系数的计算公式．它在数学物理方程的分离变数法中是很重要的．

如果本征函数的模 $N_m = 1$ $(m = 1, 2, \cdots)$，就叫作归一化的本征函数．对于正交归一化的本征函数族，(9.4-16)简化为

$$f_m = \int_a^b f(\xi) y_m(\xi) \rho(\xi) \mathrm{d}\xi. \tag{9.4-17}$$

其实，对于非归一化的本征函数儿 $y_n(x)$，只要改用从 $y_n(x)/N_m$ 作为新的本征函数，就是归一化的了．

常把(9.4-12)和(9.4-15)合并成一个式子

$$\int_a^b y_m(x) y_n(x) \rho(x) \mathrm{d}x = N_m^2 \delta_{mn} \tag{9.4-18}$$

其中 δ_{mn}

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & n = m, \\ 0, & n \neq m. \end{cases} \tag{9.4-19}$$

称为 Kronecker 符号．对于正交归一化的本征函数族，(9.4-18)简化为

$$\int_a^b y_m(x) y_n(x) \rho(x) \mathrm{d}x = \delta_{mn} \tag{9.4-20}$$

为了应用公式(9.4-16)或(9.4-17)，必须先判定本征函数族是(带权重)正交的，还必须能计算本征函数的模．在第十、第十一两章中研究球函数和柱函数时，将很重视正交关系和模的计算这两个问题．

9.4.4 复数的本征函数族

以上的讨论假定了本征函数是实变数的实值函数．但本征函数也可以是实变数的复值函数，例如本征值问题

$$\begin{cases} \Phi'' + \lambda\Phi = 0, \\ \text{自然周期条件.} \end{cases}$$

的本征函数族通常说是实函数族

$$1, \cos\varphi, \cos 2\varphi, \cos 3\varphi, \cdots, \sin\varphi, \sin 2\varphi, \sin 3\varphi, \cdots \tag{9.4-24}$$

但这完全可以代之以复函数族

$$\cdots, e^{-i3\varphi}, e^{-i2\varphi}, e^{-i\varphi}, 1, e^{i\varphi}, e^{i2\varphi}, e^{i3\varphi}, \cdots. \tag{9.4-25}$$

对于复数的本征函数族，为了保证模是实数，通常把模的定义修订为

$$N_m^2 = \int_a^b y_m(x)\,[y_m(x)]^*\,\rho(x)\mathrm{d}x, \tag{9.4-26}$$

其中 $[y_m(x)]^*$为 $y_m(x)$ 的复数共扼．正交关系也相应地修订为

$$\int_a^b y_m(x)\,[y_n(x)]^*\,\rho(x)\mathrm{d}x = 0. \tag{9.4-27}$$

(9.4-26)和(9.4-27)可合写为

$$\int_a^b y_m(x)\,[y_n(x)]^*\,\rho(x)\mathrm{d}x = N_m^2\delta_{mn}. \tag{9.4-28}$$

广义 Fourier 系数的公式(9.2-3)则修订为

$$f_m = \frac{1}{N_m^2}\int_a^b f(\xi)\left[y_m(\xi)\right]^*\rho(\xi)\mathrm{d}\xi. \tag{9.4-29}$$

9.4.5 Hilbert 空间

为了帮助理解，这里拿矢量来作类比．设想有某种无限维的所谓 Hilbert 空间，函数 $f(x)$ 好比 Hilbert 空间中的“矢量” $\vec{f}$．基本函数族(9.4-9)好比沿着各个坐标轴的“矢量” $\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3, \cdots$，它们构成 Hilbert 空间中的“基底矢量”，或简称“基”．两个函数 $f_1(x)$ 和 $f_2(x)$ 的乘积在定义域 $[a, b]$ 上带权重的积分

$$\int_a^b f_1(x) f_2(x) \rho(x) \mathrm{d}x$$

好比两个矢量的“标积” $\vec{f}_1 \cdot \vec{f}_2$．基本函数带权重的正交关系(9.4-12)好比是说 Hilbert 空间中的任意两个“基底矢量”的“标积”为零，就是说“互相垂直”．把函数 $f(x)$ 展开为广义 Fourier 级数，好比是把“矢量”表为“基底矢量”的线性组合，

$$\vec{f} = c_1 \vec{i}_1 + c_2 \vec{i}_2 + c_3 \vec{i}_3 + \cdots,$$

广义 Fourier 系数好比是这个线性组合中的系数，即“矢量” $f(x)$ 的“分量”，或“矢量” $f(x)$ 在 Hilbert 空间“基底矢量” $y_n(x)$ 上的“投影”．广义 Fourier 系数的计算公式(9.4-15) 和(9.4-16)好比是矢量的“分量”计算公式

$$c_n = \frac{\vec{f}\cdot\vec{i}_n}{\vec{i}_n\cdot\vec{i}_n}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots .$$

“基底矢量”(9.4-9)即 $\vec{i}_n$ $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ 并不一定是“单位矢量”(它们的“长度”即模不一定等于一)，因而“分量”计算公式中出现分母 $\vec{i}_n\cdot\vec{i}_n$．要是用正交归一化的基本函数族 $y_n(x)/N_n$，由于它们的模为一，就是说，采用“单位矢量”作为“基”，那么，“分量”的计算公式就无需分母 $\vec{i}_n\cdot\vec{i}_n$．这时广义博里叶系数的计算公式为(9.4-17)．

§ 9.1 并没有把球坐标系和柱坐标系中的分离变数法进行到底．现在 Legendre 方程和 Bessel 方程已经解出，下面两章将继续研究球坐标系和柱坐标系中的分离变数法．

限于篇幅，在特殊函数之中，本书只讨论球函数和柱函数．附录十和十一简略介绍 Hermite 多项式和 Laguerre 多项式．